

文章编号:1005-3085(2009)06-0997-08

## 对流-扩散-反应方程的变分多尺度解法\*

朱海涛, 欧阳洁

(西北工业大学应用数学系, 西安 710072)

**摘 要:** 根据变分多尺度的思想求解了对流项和反应项占优的对流-扩散-反应方程。在变分多尺度思想的理论框架内, 推导了附加于 Galerkin 变分弱形式的稳定化结构和具体的稳定化系数; 阐述了这种稳定化结构和经典的 SUPG 稳定化结构之间的关系; 数值算例表明, 该稳定化系数可以适应均匀和非均匀的计算网格。通过网格的恰当加密, 变分多尺度方法消除了算例中的数值伪振荡。

**关键词:** 对流-扩散-反应方程; 变分多尺度方法; SUPG; 稳定化方法

**分类号:** AMS(2000) 80M25

**中图分类号:** O241

**文献标识码:** A

### 1 引言

用标准 Galerkin 方法求解对流-扩散-反应方程, 当对流项或反应项占优时, 数值结果会伴随着剧烈的数值伪振荡。通过在 Galerkin 变分弱形式的左端加上一项基于原偏微分方程残差的稳定项而产生的稳定化类方法, 既使该类数值计算方法获得了相容性, 又获得了稳定性<sup>[1]</sup>, 从而保证了稳定化类方法的收敛性。这类方法包括: SUPG (Streamline Upwind/Petrov-Galerkin)、GLS (Galerkin Least Squares)、USFEM (Unusual Stabilized Finite Element Methods) 等。但是, 这类方法的缺点是最优的稳定化系数很难确定。上世纪 90 年代, Hughes 考虑了各种稳定化方法, 提出了变分多尺度方法的基本理论框架<sup>[2,3]</sup>。本文根据变分多尺度的思想求解了对流项和反应项占优的对流-扩散-反应方程, 主要的工作是: 1) 在变分多尺度的理论框架内, 用泡函数近似“细”尺度上的解, 推导了用变分多尺度方法求解该方程的附加于 Galerkin 变分弱形式的稳定化结构及对应的稳定化系数; 2) 阐述了在线性和双线性的情形下, 变分多尺度方法的稳定化结构和经典的 SUPG 稳定化结构之间的关系; 3) 基于变分多尺度思想求解了两个具有代表性的数值算例, 并通过网格加密技术与变分多尺度方法的耦合, 消除了算例中由对流项和反应项占优引起的数值伪振荡。

### 2 对流-扩散-反应方程

考虑如下的对流-扩散-反应方程

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \nabla u - k \Delta u + su &= f \quad \text{在 } \Omega \text{ 内,} \\ u &= 0 \quad \text{在 } \partial\Omega \text{ 上,} \end{aligned} \tag{1}$$

收稿日期: 2008-05-09. 作者简介: 朱海涛(1982年4月生), 男, 硕士. 研究方向: 数值仿真.

\*基金项目: 国家自然科学基金(10590353); 国家重点基础研究发展计划(2005CB321704).

其中  $\mathbf{a}$  为已知的对流速度;  $k$  是扩散系数,  $k \geq 0$ ;  $s$  是已知的反应项系数;  $f$  是已知的源项。记  $\zeta_h$  为求解区域  $\Omega$  的正规剖分,  $K \in \zeta_h$  是  $\zeta_h$  中的任一有限单元,  $h_K$  是单元  $K$  的直径

$$h = \max_{K \in \zeta_h} \{h_K\}, \quad V_1 = \{v_h \in H_0^1(\Omega) \mid v_h|_K \in P^1(K), \forall K \in \zeta_h\},$$

$P^1(K)$  是单元  $K$  上连续的线性或双线性多项式函数空间。

方程 (1) 对应的标准 Galerkin 离散格式为: 求  $u_h \in V_1 \subset H_0^1(\Omega)$ , 满足

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u_h, v_h)_\Omega + k(\nabla u_h, \nabla v_h)_\Omega + (s u_h, v_h)_\Omega = (f, v_h)_\Omega, \quad \forall v_h \in V_1 \subset H_0^1, \quad (2)$$

这里  $(u, v) = \int_D u v dx$ , 除非特别声明,  $D = \Omega$ 。当  $k \ll |\mathbf{a}|$  或  $k \ll s$  时, 上述求解格式会伴随着剧烈的无任何物理意义的数值伪振荡。本文根据变分多尺度的基本思想, 用泡函数近似“细”尺度上的解, 引入了类似经典 SUPG 稳定化方法的稳定项, 增加数值求解格式的稳定性。

### 3 对流-扩散-反应方程的变分多尺度分析

记  $\Gamma = \cup_{K \in \zeta_h} \partial K$ ,  $B = \{b \mid b \in H_0^1/V_1, b = 0, \text{在 } \Gamma \text{ 上}\}$ ,  $\Omega' = \cup_{K \in \zeta_h} (\text{int} K)$ 。在变分多尺度的理论框架内, 首先把试验函数和检验函数分解为“粗、细”两种尺度, 即

$$u(x) = \bar{u}(x) + u'(x), \quad (3)$$

$$v(x) = \bar{v}(x) + v'(x), \quad (4)$$

其中  $\bar{u}(x)$  和  $\bar{v}(x)$  分别为“粗”尺度上的试验函数和检验函数;  $u'(x)$  和  $v'(x)$  分别为“细”尺度上的试验函数和检验函数。 $\bar{u}(x) \in V_1$ ,  $\bar{v}(x) \in V_1$ ;  $u'(x) \in B$ ,  $v'(x) \in B$ , 因此,  $u(x) \in V_1 \oplus B$ , 即我们用  $B$  中的函数近似“细”尺度上的解, 后面将会看到, 所谓的“细”尺度的解其实是“粗”尺度解的误差。把式 (3)、(4) 代入式 (2) 中可得

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla(\bar{u} + u'), \bar{v} + v') + k(\nabla(\bar{u} + u'), \nabla(\bar{v} + v')) + (s(\bar{u} + u'), \bar{v} + v') = (f, \bar{v} + v'), \quad (5)$$

由  $V_1$  和  $B$  的线性无关性, 可以把式 (5) 分解为“粗、细”两种尺度, 即

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla(\bar{u} + u'), \bar{v}) + k(\nabla(\bar{u} + u'), \nabla \bar{v}) + (s(\bar{u} + u'), \bar{v}) = (f, \bar{v}), \quad (6)$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla(\bar{u} + u'), v') + k(\nabla(\bar{u} + u'), \nabla v') + (s(\bar{u} + u'), v') = (f, v'). \quad (7)$$

#### 3.1 细尺度上方程的求解

由  $v'$  在  $\partial K$  上为零, 式 (7) 可以写为如下的形式

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla(\bar{u} + u'), v')_{\Omega'} + k(\nabla(\bar{u} + u'), \nabla v')_{\Omega'} + (s(\bar{u} + u'), v')_{\Omega'} = (f, v')_{\Omega'}, \quad (8)$$

其中

$$(u, v)_{\Omega'} = \sum_{K \in \zeta_h} \int_K u v dx.$$

式 (8) 等价于

$$\begin{aligned} & (\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u}, v')_{\Omega'} + (\mathbf{a} \cdot \nabla u', v')_{\Omega'} + k(\nabla \bar{u}, \nabla v')_{\Omega'} \\ & + k(\nabla u', \nabla v')_{\Omega'} + (s \bar{u}, v')_{\Omega'} + (s u', v')_{\Omega'} = (f, v')_{\Omega'}, \end{aligned} \quad (9)$$

对上式左端第三项应用散度定理, 整理可得

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u', v')_{\Omega'} + k(\nabla u', \nabla v')_{\Omega'} + (su', v')_{\Omega'} = -(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u} - f, v')_{\Omega'}, \quad (10)$$

式(10)体现了变分多尺度方法的基本思想, 该式等价于

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u' - k\Delta u' + su')_{\Omega'} = -(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u} - f)_{\Omega'}, \quad (11)$$

即, “细”尺度解是“粗”尺度解的误差, “粗、细”尺度上的解的和为原偏微分方程的精确解。需要指出的是: 式(11)只在单元内部成立。

记  $\varepsilon = \mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u} - f$ , 表示由“粗”尺度解引起的原微分方程的残差。式(10)即为

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla u', v')_{\Omega'} + k(\nabla u', \nabla v')_{\Omega'} + (su', v')_{\Omega'} = -(\varepsilon, v')_{\Omega'}, \quad (12)$$

上式就是我们要求解的细尺度上的变分问题, 它与式(11)等价。求解式(12)有多种方法, 如 Green 函数法<sup>[2,3]</sup>, 双层有限元方法<sup>[8]</sup>等; 本文采用泡函数近似“细”尺度解求解式(12)。与稳定化方法相对应, 变分多尺度方法在“细”尺度上的解将最终影响稳定化因子的确定。为了在稳定化因子中考虑对流项的影响, 求解式(12)的过程中选取了不同的试验函数和检验函数。

为简单起见, 假设试验函数和检验函数均只用一个基函数, 分别为  $b_1^e$  和  $b_2^e$ , 则试验函数和检验函数分别为:  $u' = u_b b_1^e$ ,  $v' = v_b b_2^e$ , 代入式(12)可得

$$u_b [(\mathbf{a} \cdot \nabla b_1^e, b_2^e)_{\Omega'} + k(\nabla b_1^e, \nabla b_2^e)_{\Omega'} + (sb_1^e, b_2^e)_{\Omega'}] v_b = -(\varepsilon, b_2^e)_{\Omega'} v_b, \quad (13)$$

由  $v_b$  的任意性, 有

$$u_b = -(\varepsilon, b_2^e)_{\Omega'} [(\mathbf{a} \cdot \nabla b_1^e, b_2^e)_{\Omega'} + k(\nabla b_1^e, \nabla b_2^e)_{\Omega'} + (sb_1^e, b_2^e)_{\Omega'}]^{-1}, \quad (14)$$

即

$$u' = b_1^e \{ -(\varepsilon, b_2^e)_{\Omega'} [(\mathbf{a} \cdot \nabla b_1^e, b_2^e)_{\Omega'} + k(\nabla b_1^e, \nabla b_2^e)_{\Omega'} + (sb_1^e, b_2^e)_{\Omega'}]^{-1} \}, \quad (15)$$

为了引入基于原偏微分方程残差的稳定项, 保证整体求解格式的相容性, 用常数近似由“粗”尺度上的解引起的原偏微分方程在每个单元内的残差, 引入记号  $\tau$ , “细”尺度上的解可简化为

$$u' = -\tau(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u} - f), \quad (16)$$

$$\tau = b_1^e \{ (1, b_2^e)_{\Omega'} [(\mathbf{a} \cdot \nabla b_1^e, b_2^e)_{\Omega'} + k(\nabla b_1^e, \nabla b_2^e)_{\Omega'} + (sb_1^e, b_2^e)_{\Omega'}]^{-1} \}. \quad (17)$$

### 3.2 粗尺度上方程的求解

考虑式(6)“粗”尺度方程的求解。式(6)等价于

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u}, \bar{v}) + (\mathbf{a} \cdot \nabla u', \bar{v}) + k(\nabla \bar{u}, \nabla \bar{v}) + k(\nabla u', \nabla \bar{v}) + (s\bar{u}, \bar{v}) + (su', \bar{v}) = (f, \bar{v}), \quad (18)$$

对上式左端第二、四项应用散度定理, 整理可得

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u}, \bar{v}) + k(\nabla \bar{u}, \nabla \bar{v}) + (s\bar{u}, \bar{v}) + (u', -\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{v} - k\Delta \bar{v} + s\bar{v}) = (f, \bar{v}), \quad (19)$$

把式(16), (17)代入式(19)中, 有

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u}, \bar{v}) + k(\nabla \bar{u}, \nabla \bar{v}) + (s\bar{u}, \bar{v}) + (-\tau(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u} - f), -\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{v} - k\Delta \bar{v} + s\bar{v}) = (f, \bar{v}). \quad (20)$$

### 3.3 稳定化结构和稳定化因子

稳定化类方法的计算格式由标准的 Galerkin 离散格式和稳定项两部分组成; 稳定项由残差项、稳定化因子和稳定化函数组成, 即一般的稳定化计算格式为

$$G(u, v) + \sum_K (\varepsilon(u), \tau P(v)) = (f, v). \quad (21)$$

其中  $G(u, v)$  为标准的 Galerkin 变分式,  $\varepsilon(u)$  为原偏微分方程的残差,  $P(v)$  为稳定化函数,  $\tau$  为稳定化系数。考虑经典的稳定化方法 SUPG, 有

$$P(v) = \mathbf{a} \cdot \nabla v, \quad (22)$$

$\tau$  是一个根据经验人为设计的一个稳定化因子, 具体计算公式参考文 [1,5]。SUPG 方法引入了基于原偏微分方程残差的稳定项, 因此可以保证稳定化后计算格式的相容性, 关于 SUPG 稳定化方法稳定性的证明可参见文 [1,5], 由相容性和稳定性保证了数值求解格式的收敛性。

考虑变分多尺度方法引入的稳定项, 由式(20)知

$$P(v) = \mathbf{a} \cdot v + k\Delta v - sv, \quad (23)$$

$\tau$  由式(17)给定。在实际计算中, 出于简单性的考虑我们忽略了第三项的影响, 即取

$$P(v) = \mathbf{a} \cdot v + k\Delta v, \quad (24)$$

显然, 在线性和双线性情形下, 变分多尺度方法引入的稳定项和 SUPG 稳定化方法的稳定项有相同的结构。由于该方法引入了基于原偏微分方程残差的稳定项, 因此, 可以保证求解格式的相容性。

与传统稳定化方法的稳定化因子不同, 变分多尺度方法引入的稳定化因子不是一个人设计的常数, 而是一个与“细”尺度解密切相关的函数。当对流项占优时,  $\tau$  是  $O(h/|\mathbf{a}|)$ ; 当扩散项占优时,  $\tau$  是  $O(h^2/k)$ ; 当反应项占优时,  $\tau$  是  $O(1/s)$ , 这与文献 [4-7] 中的分析一致。

基于上述分析, 采用线性和双线性有限单元求解方程(1)的变分多尺度公式为

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u}, \bar{v}) + k(\nabla \bar{u}, \nabla \bar{v}) + (s\bar{u}, \bar{v}) + (\tau(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{u} - k\Delta \bar{u} + s\bar{u}), \mathbf{a} \cdot \nabla \bar{v} + k\Delta \bar{v}) = (f, \bar{v}) + (f, \tau(\mathbf{a} \cdot \nabla \bar{v} + k\Delta \bar{v})). \quad (25)$$

## 4 数值算例

对流—扩散—反应方程不仅在边界上可以形成尺度很小的边界层效应, 而且当边界条件存在间断时还会出现尺度非常小的内部层效应。本部分我们考虑两个具有代表性的数值算例, 第一个算例为连续的边界条件, 主要形成边界层效应; 第二个算例为间断的边界条件, 形成边界层效应和内部层效应。

### 4.1 数值算例 1

首先考虑如下的数值算例

$$\mathbf{a} \cdot \nabla u - k \Delta u + su = 1 \quad \text{在 } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \text{ 内,}$$
$$u = 0 \quad \text{在 } \partial\Omega \text{ 上,}$$

其中  $k = 10^{-4}$ ,  $\mathbf{a} = |\mathbf{a}|(\cos(\pi/3), \sin(\pi/3))$ ,  $|\mathbf{a}|$  和  $s$  分别取以下三种情形:

- (a)  $|\mathbf{a}| = 1.0, s = 0.0001$ , 对应于对流占优时的情形;
- (b)  $|\mathbf{a}| = 0.5, s = 1.0$ , 对应于对流、反应同时占优;
- (c)  $|\mathbf{a}| = 0.0001, s = 1.0$ , 对应于反应占优时的情形;

图1, 图2分别是经典SUPG稳定化方法和变分多尺度方法的计算结果, 其中计算网格为  $20 \times 20$  的均匀矩形网格。在(a)、(b)、(c)三种情形下, 标准的 Galerkin 方法均存在严重的数值伪振荡。图1是对应于(a)、(b)、(c)三种情形的经典 SUPG 稳定化方法的数值结果; 图2是对应于(a)、(b)、(c)三种情形的变分多尺度 (Variational Multiscale, 简称 VM) 方法的数值结果。可以看出, 当对流占优时, 在边界处变分多尺度方法有较 SUPG 更剧烈的数值伪振荡, 原因是实际计算中采用的简化后的“细”尺度模型在较粗的计算网格上没有很好地捕捉到具有极细尺度特征的边界层效应的物理信息。

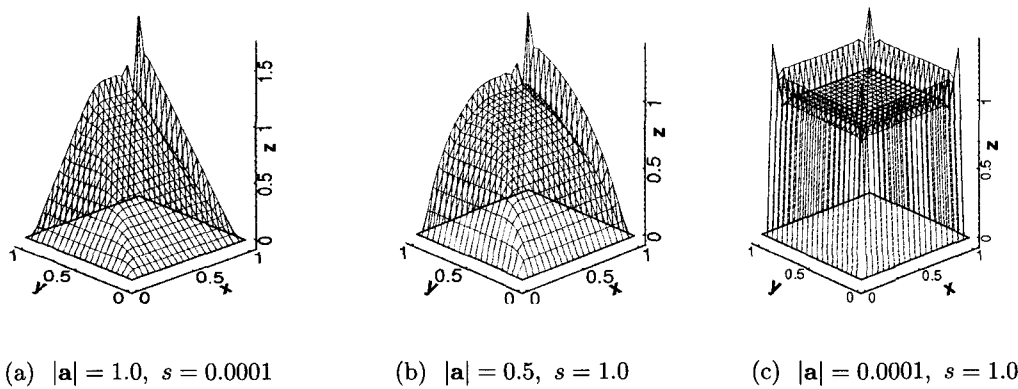


图1: 均匀网格上 SUPG 方法的数值解

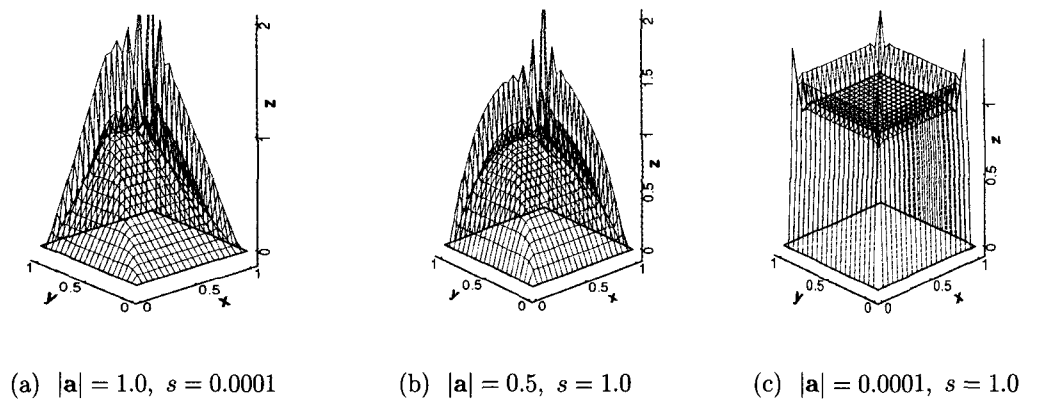


图2: 均匀网格上 VM 方法的数值解

为了消除边界上存在的数值伪振荡,我们设计了在边界处加密的非均匀网格,采用的 $20 \times 20$ 的非均匀矩形计算网格如图3所示。图4是对应于(a)、(b)、(c)三种情形的经典SUPG稳定化方法的数值结果;图5是对应于(a)、(b)、(c)三种情形的变分多尺度方法的数值结果。由图5可见,我们得到的结果明显优于文献[6]的结果,后者使用SUPG稳定化方法,尽管采用了 $42 \times 42$ 的非均匀计算网格,但并没有消除在点(1.0,1.0)处的数值伪振荡;而图5的结果完全地消除了边界处的数值伪振荡。与此同时,对比图4和图5可发现,与变分多尺度解相比,SUPG解的精度较低。其原因是SUPG解的精度与稳定化因子密切相关,而稳定化因子又与网格尺寸、网格疏密有紧密的联系。人为设计的稳定化因子对非均匀的计算网格缺乏弹性;而由变分多尺度方法计算出来的稳定化因子实际是一个与“细”尺度上解密切相关的函数,因此可以很好地适应均匀和非均匀网格。

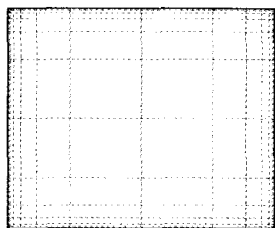


图3: 算例1的非均匀计算网格

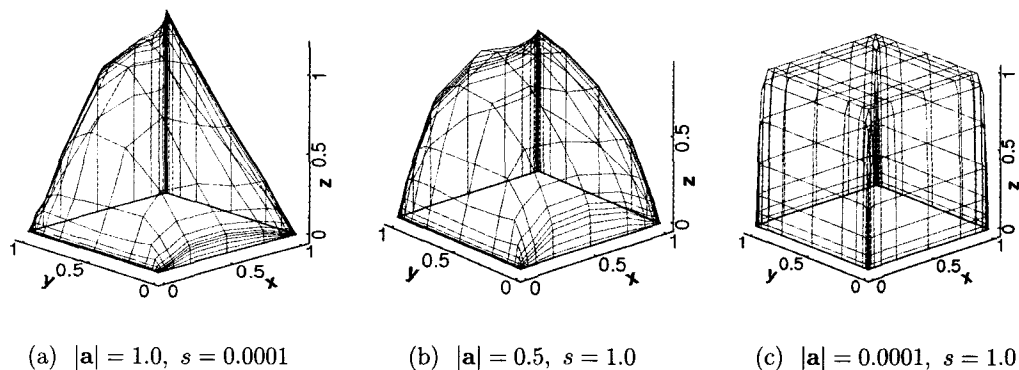


图4: 非均匀网格上SUPG方法的数值解

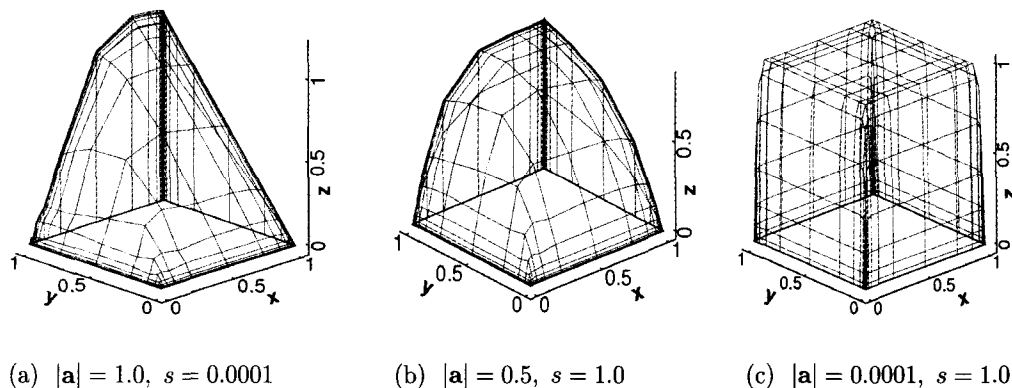


图5: 非均匀网格上VM方法的数值解

4.2 数值算例 2

考虑如下具有间断边界条件的数值算例

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \nabla u - k \Delta u + su &= 0 \quad \text{在 } \Omega = [0, 1] \times [0, 1] \text{ 内,} \\ u &= 1 \quad \text{在 } x = 0, \text{ 或 } y = 1 \text{ 上,} \\ u &= 0 \quad \text{在 } x = 1, \text{ 或 } y = 0 \text{ 上,} \end{aligned}$$

其中  $k = 10^{-4}$ ,  $\mathbf{a} = |\mathbf{a}|(\cos(\pi/4), \sin(\pi/4))$ ,  $|\mathbf{a}|$  和  $s$  分别取以下三种情形:

- (a)  $|\mathbf{a}| = 1.0, s = 0.0001$ , 对应于对流占优时的情形;
- (b)  $|\mathbf{a}| = 0.5, s = 1.0$ , 对应于对流、反应同时占优;
- (c)  $|\mathbf{a}| = 0.0001, s = 1.0$ , 对应于反应占优时的情形;

在 (a), (b), (c) 三种情形下, 标准的 Galerkin 方法均伴随着剧烈的数值伪振荡; 图 6 是对应于以上 (a), (b), (c) 三种情形的变分多尺度方法的计算结果, 其中情形 (a) 主要形成内部层效应, 因此采用  $40 \times 40$  的均匀网格, 情形 (b) 和 (c) 均采用边界附近局部加密的  $40 \times 40$  非均匀网格。可以看出, 变分多尺度方法消除了由边界层效应和内部层效应引起的数值伪振荡。

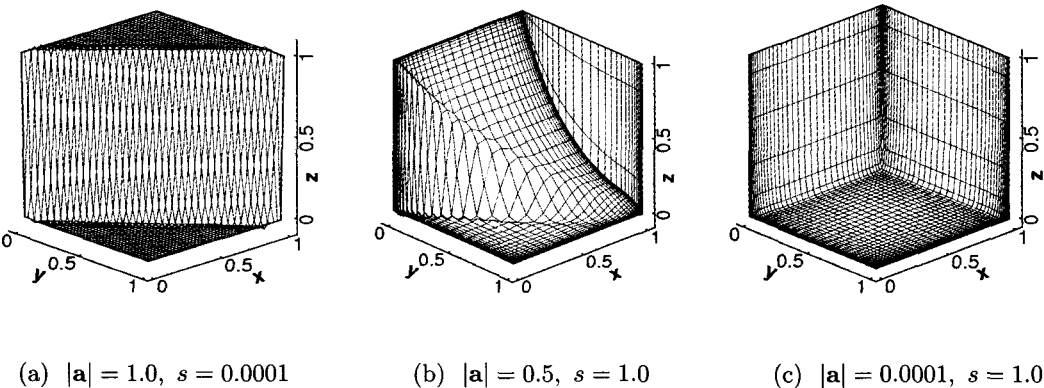


图 6: 算例 2VM 方法的数值解

5 结论

变分多尺度方法是一种有效处理具有多尺度效应的数学物理问题的数值方法。在变分多尺度方法的框架内可以推导出经典的稳定化方法, 如 SUPG、GLS 稳定化方法等; 与此同时变分多尺度方法引入了和经典稳定化方法结构相同的稳定项, 保证了计算格式与原偏微分方程的相容性。除此之外, 在该框架内可以自动地计算出稳定化因子, 该稳定化因子实际上是一个与“细”尺度上的解密切相关的函数, 它较人为根据经验设计的稳定化系数具有更强的适应性, 不仅适用于均匀网格, 也适应非均匀网格。通过网格加密技术与变分多尺度方法的耦合, 可以消除在对流-扩散-反应方程中由边界层效应和内部层效应引起的数值伪振荡。

## 参考文献:

- [1] Jean Donea, Antonio Huerta. Finite Element Methods for Flow Problems[M]. Chichester: Wiley, 2003
- [2] Hughes T J R. Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1995, 127: 387-401
- [3] Hughes T J R, Feijoo G R, Luca M, et al. The variational multiscale methods-a paradigm of computational mechanics[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1998, 166(1-2): 3-24
- [4] Franca L P, Madureira A L, Valentin F. Towards multiscale functions: enriching finite element spaces with local but not bubble-like functions[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2005, 194: 3006-3021
- [5] Franca L P, Valentin F. On an improved unusual stabilized finite element method for the advection-reaction-diffusion equation[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2000, 190: 1758-1800
- [6] Ramon Codina. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1998, 156: 185-210
- [7] Masud A, Khurram R A. A multiscale/stabilized finite element method for advection-diffusion equation[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2004, 193: 1997-2018
- [8] Franca L P, Nesliturk A, Stynes M. On the stability of residual-free bubbles for convection-diffusion problems and their approximation by two-level finite element method[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1998, 166: 35-49

## Variational Multiscale Method for the Advection-diffusion-reaction Equation

ZHU Hai-tao, OUYANG Jie

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072)

**Abstract:** The advection-diffusion-reaction equation dominated by either advection or reaction is solved by using the variational multiscale method, which preserves the superior properties of the classical stabilized methods such as SUPG, GLS. The variational multiscale method decomposes the scalar field into coarse scale and fine scale, respectively; then the fine scale incorporates into the coarse scale through a bubble function to correct the lack of stability of the coarse scale; at last, the coarse scale is solved by the finite element method. A distinctive feature of the proposed method is that the stabilized parameter can be calculated automatically which adapts to uniform and nonuniform grids. The spurious oscillation in our numerical examples is eliminated by coupling the variational multiscale method with nonuniform grids.

**Keywords:** advection-diffusion-reaction; variational multiscale; SUPG; stabilized methods